Hamiltonià de Dimmock. Valls obliqües

Josep Planelles

28 de setembre de 2019

1 La direcció [111]

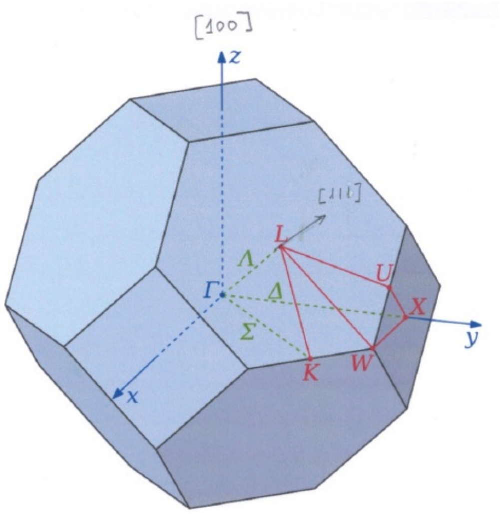

Figura 1: Rock-salt xarxa recíproca .

Les sals de plom presenten el gap en el punt L (centre de la cara hexagonal de la primera zona de Brillouin, 1BZ). Si triem l'eix z en la direcció [100] les quatre valls al voltant dels quatre punts L són equivalents.[1]

Tanmateix, si triem z en la direcció [111], és a dir, en la direcció del punt L, hi ha una de les valls que no és equivalent a les altres tres. Per tant, la degeneració passa de quatre a tres més u.

Com vam veure en els apunts "Pb salts"de novembre de 2017, si triem z en la direcció [111] l'hamiltonià de Dimmock o hamiltonià de dues bandes (conducció i valència) que representa la vall singularitzada, se pot escriure com una matriu 4×4 (és 4×4 i no 2×2 perquè inclou espín).

$$H = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} |L_6^-\uparrow\rangle & |L_6^-\downarrow\rangle & |L_6^+\uparrow\rangle & |L_6^+\downarrow\rangle \end{array} \\ \begin{bmatrix} \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 {k_t}^2}{2m_t^-} + \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m_l^-} & 0 & \frac{\hbar}{m} P_l k_z & \frac{\hbar}{m} P_t (k_x - i k_y) \\ 0 & \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 {k_t}^2}{2m_t^-} + \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m_l^-} & \frac{\hbar}{m} P_t (k_x + i k_y) & -\frac{\hbar}{m} P_l k_z \\ \frac{\hbar}{m} P_l k_z & \frac{\hbar}{m} P_t (k_x - i k_y) & -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2 {k_t}^2}{2m_t^+} - \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m_l^+} & 0 \\ \frac{\hbar}{m} P_t (k_x + i k_y) & -\frac{\hbar}{m} P_l k_z & 0 & -\frac{E_g}{2} - \frac{\hbar^2 {k_t}^2}{2m_t^+} - \frac{\hbar^2 {k_z}^2}{2m_l^+} \end{bmatrix} \end{array}$$

on m és la massa de l'electró lliure (m=1 a.u.).

[1] La 1BZ presenta vuit cares hexagonals, per tant hi ha vuit punts L. Ara be, com cada cara hexagonal està compartida per dues cel·les, hi ha 4 punts L per cel·la.

Tenint en compte que $k_t \cdot \sigma_t = \begin{pmatrix} k_x & k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} = k_x\sigma_x + k_y\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}$, podem escriure:

$$H = \begin{bmatrix} (\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t^-} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l^-})\mathbb{I} & \frac{\hbar}{m} P_l k_z \sigma_z + \frac{\hbar}{m} P_t k_t \sigma_t \\ \frac{\hbar}{m} P_l k_z \sigma_z + \frac{\hbar}{m} P_t k_t \sigma_t & (\frac{-E_g}{2} - \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t^+} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l^+})\mathbb{I} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_c & h_{cv} \\ h_{vc} & h_v \end{bmatrix} \tag{1}$$

amb $h_{cv} = h_{vc}$.

Considerem ara la deducció d'un hamiltonià efectiu d'una banda (conducció o valencia) a partir de l'equació d'autovalors de l'hamiltonià complet:

$$\begin{bmatrix} h_c & h_{cv} \\ h_{vc} & h_v \end{bmatrix} \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} F_c \\ F_v \end{pmatrix} \tag{2}$$

que equival al conjunt d'equacions

$$\begin{aligned} h_c F_c + h_{cv} F_v &= E F_c \\ h_{vc} F_c + h_v F_v &= E F_v \end{aligned} \tag{3}$$

de la segon equació tenim que $(E - h_v)F_v = h_{vc}F_c \rightarrow F_v = (E - h_v)^{-1} h_{vc} F_c$, que portat a la primera equació ens proporciona l'hamiltonià efectiu per a la conducció (de manera semblant podem obtenir l'hamiltonià efectiu per a la valència):

$$\left[h_c + h_{cv}(E - h_v)^{-1} h_{vc}\right] F_c = E F_c \tag{4}$$

Si escrivim $\Delta = (\frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t^-} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_l^-})$, aleshores, $h_v = -\Delta\mathbb{I}$, amb $\mathbb{I}$ representant la matriu identitat 2×2. Com la inversa de la matriu identitat és ella mateix, el càlcul de la inversa $(E - h_v)^{-1}$ és immediat: hi ha prou en invertir el factor $(E + \Delta)$ que multiplica la matriu $\mathbb{I}$ en $(E - h_v)$. És a dir, $(E - h_v)^{-1} = \frac{1}{E+\Delta}\mathbb{I}$. Finalment, si considerem el problema d'una heterounió (e.g. un quantum well en la direcció vertical), aleshores l'energia del gap E_g és una funció escaló de la variable z. Per tant, també $\Delta(z)$ i $(E - h_v)^{-1} = F(z)\mathbb{I}$, on $F(z) = \frac{1}{E+\Delta(z)}$.

Amb aquestes consideracions, i simplificant la notació en el sentit de que el producte $\frac{\hbar}{m}P$ l'escrivim simplement P, el terme $h_{cv}(E - h_v)^{-1} h_{vc}$ de l'eq. (4) el podem escriure:

$$\begin{aligned} h_{cv}(E - h_v)^{-1} h_{vc} &= [P_l k_z \sigma_z + P_t k_x \sigma_x + P_t k_y \sigma_y] F(z) [P_l k_z \sigma_z + P_t k_x \sigma_x + P_t k_y \sigma_y] \\ &= \mathbb{I}(F P_l^2 k_z^2 + P_l^2 k_z(F) k_z) + i\sigma_y(F P_l P_t k_z k_x + P_l P_t k_z(F) k_x) \\ &\quad -i\sigma_x(F P_l P_t k_z k_y + P_l P_t k_z(F) k_y) - i\sigma_y P_l P_t F k_x k_z + \mathbb{I} P_t^2 F k_x^2 \\ &\quad +i\sigma_z P_t^2 F k_x k_y + i\sigma_x P_l P_t F k_y k_z - i\sigma_z P_t^2 F k_y k_x + \mathbb{I} P_t^2 F k_y^2 \\ &= \mathbb{I} F[P_l^2 k_z^2 + P_t^2(k_x^2 + k_y^2)] + \mathbb{I} P_l^2 k_z(F) k_z + i\sigma_y(F P_l P_t k_z k_x - F P_l P_t k_x k_z) \\ &\quad +i\sigma_y P_l P_t k_z(F) k_x + i\sigma_x(F P_t P_l k_y k_z - F P_l P_t k_z k_y) - i\sigma_x P_l P_t k_z(F) k_y \\ &\quad +i\sigma_z(F P_t^2 k_x k_y - F P_t^2 k_y k_x) \end{aligned} \tag{5}$$

els parèntesis en la darrera igualtat són zero per la commutació de les components dels moment lineal, amb la qual cosa ens queda:[2]

$$\begin{aligned} h_{cv}(E-h_v)^{-1}h_{vc} &= \mathbb{I}F(P_l^2k_z^2+P_t^2k_t^2)+\mathbb{I}P_l^2k_z(F)k_z+i\sigma_yP_lP_tk_z(F)k_x-i\sigma_xP_lP_tk_z(F)k_y \\ &= \mathbb{I}(P_l^2k_zFk_z+P_t^2Fk_t^2)-iP_lP_tk_z(F)(\sigma\times k_t\cdot\hat{z}) \end{aligned} \tag{6}$$

on $\hat{z}$ és vector unitari en la direcció z. Generalment el segon terme de la darrere equació, que és de tipus Rashba, pot rebutjar-se en el cas de pous quàntics simètrics, ja que $k_z(F)$ és zero excepte en les heterounions. A més, com E_g puja/baixa en entrar al pou i baixa/puja en sortir-ne, les derivades $k_z(F)$ tenen signes contraris i pot haver-hi una cancel·lació efectiva. Considerem doncs únicament el terme $\mathbb{I}(P_l^2k_zFk_z+P_t^2Fk_t^2)$ que cal sumar a $h_c=(\frac{E_g}{2}+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_t^-}-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_l^-}\frac{d}{dz})$ per obtenir l'hamiltonià efectiu cercat.[3]

$$h_{cv}(E-h_v)^{-1}h_{vc}=\mathbb{I}\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_z}\frac{d}{dz}+\frac{\hbar^2k_t^2}{2m_\perp}+\frac{E_g(z)}{2}\right) \tag{7}$$

Si en lloc de $F(z)$ tenim $F(x,y,z)$ apareixen els següents termes addicionals en la derivació anterior:

$$\begin{aligned} &-i\sigma_yP_tP_lk_x(F)k_z+\mathbb{I}\,P_t^2k_x(F)k_x+i\sigma_zP_t^2k_x(F)k_y \\ &+i\sigma_xP_tP_lk_y(F)k_z-i\sigma_zP_t^2k_y(F)k_x+\mathbb{I}\,P_t^2k_y(F)k_y \end{aligned} \tag{8}$$

Els termes que multipliquen $\mathbb{I}$ contribueixen a formar $P_t^2(k_xFk_x+k_yFk_y)$, els quals se sumaran al terme cinètic de h_c, la resta,

$$iP_tP_l\left[k_y(F)\sigma_x-k_x(F)\sigma_y\right]k_z+i\sigma_zP_t^2\left[k_x(F)k_y-k_y(F)k_x\right]$$

són termes semblants als termes que abans hem rebutjat, els quals contenen una derivada que és sempre zero, excepte ens les heterounions i que, en pous simètrics –com ara els dels platelets enterrats en matrius o platelets col·loïdals– pot haver-hi una cancel·lació efectiva. Si rebutgem tots aquests termes, trobem que l'hamiltonià efectiu sembla un hamiltonià de massa variable típic, excepte que les masses, a més de poder ser variables amb la posició, tenen al seu interior l'energia, cosa que fa que incloguin la interacció entre bandes de conducció i valència. A efectes pràctics, consideren que les masses són únicament variables amb la posició, de manera que:

$$H=-\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{d}{dx}\frac{1}{m_\perp}\frac{d}{dx}+\frac{d}{dy}\frac{1}{m_\perp}\frac{d}{dy}+\frac{d}{dz}\frac{1}{m_z}\frac{d}{dz}\right)+V(x,y,z) \tag{9}$$

[2] Cal fer notar la diferència entre $k_z(F)k_i$ i k_zFk_i. En el primer cas la magnitud multiplicativa $k_z(F)$ –on hem derivat F respecte de z– la multipliquem per l'operador k_i. En el segon cas, tenim tres operadors consecutius: k_z, F i k_i, on el primer i tercer impliquen derivades i el segon és purament multiplicatiu.

[3] En cas de massa constant, $-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_l^-}\frac{d}{dz}=-\frac{\hbar^2}{2m_l^-}\frac{d^2}{dz^2}=\frac{\hbar^2k_z^2}{2m_l^-}$. Notem que, seguint Kang i Wise, usem la definició $k_z=-i\frac{d}{dz}$. Tanmateix, com h_c és un operador, el terme cinètic en z ha de ser de la forma $-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_l^-}\frac{d}{dz}$ si la massa és variable.

2 Hamiltonià per als tres valls no equivalents, o per als quatre equivalents si l'eix z va en la direcció [100]. Rotacions

2.1 Consideracions preliminars: matrius de rotació de l'espín i de l'espai

En els apunts *Pb salts* de novembre de 2017 vam derivar la matriu de rotació d'angle θ al voltant de l'eix z,

$$R_z(\theta) = e^{i\theta \hat{S}_z/\hbar} = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_z} = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\theta}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\theta}{2}} \end{pmatrix} \tag{10}$$

Anàlogament,

$$\begin{aligned} R_x(\theta) &= e^{i\theta \hat{S}_x/\hbar} = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_x} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ R_y(\theta) &= e^{i\theta \hat{S}_y/\hbar} = e^{i\frac{\theta}{2}\sigma_y} = \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & \sin\frac{\theta}{2} \\ -\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{11}$$

on hem tingut en compte les sèries polinòmiques de Taylor de les funcions sin i cos.

Fem algunes comprovacions,

$$\begin{aligned} R_x(\theta)\sigma_z R_x(\theta)^{-1} &= \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & i\sin\frac{\theta}{2} \\ i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta}{2} & -i\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\sin\frac{\theta}{2} & \cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos\theta & -i\sin\theta \\ i\sin\theta & -\cos\theta \end{pmatrix} = \cos\theta\ \sigma_z + \sin\theta\ \sigma_y \end{aligned} \tag{12}$$

Anàlogament, $R_x(\theta)\sigma_x R_x(\theta)^{-1} = \sigma_x$ i $R_x(\theta)\sigma_y R_x(\theta)^{-1} = -\sin\theta\ \sigma_z + \cos\theta\ \sigma_y$. En altres paraules, el vector $\vec{\sigma}$ rotat un angle θ al voltant de l'eix x resulta en $(\sigma_x, \sigma_y\ \cos\theta - \sigma_z\ \sin\theta, \sigma_y\ \sin\theta + \sigma_z\ \cos\theta)$, vector que també podríem haver obtingut amb:

$$R_x(\theta)\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} \tag{13}$$

de la mateixa manera que efectuem la rotació del moment lineal

$$R_x(\theta)\vec{k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\theta & -\sin\theta \\ 0 & \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_x \\ k_y\cos\theta - k_z\sin\theta \\ k_y\sin\theta + k_z\cos\theta \end{pmatrix}.$$

2.2 Identitats matemàtiques que seran útils en la següent subsecció

$$\begin{aligned} &\cos^4\theta + \tfrac{1}{4}\sin^2 2\theta = \cos^2\theta \\ &\sin^4\theta + \tfrac{1}{4}\sin^2 2\theta = \sin^2\theta \\ &\sin 2\theta\cos^2\theta - \tfrac{1}{4}\sin^2 2\theta = 0 \end{aligned} \tag{14}$$

2.3 L'hamiltonià per a les altres tres valls equivalents en la orientació [111]: rotació de l'hamiltonià de Dimmock

Procedim a rotar l'hamiltonià efectiu, eq. (4) per tenir-lo expressat en els eixos d'un dels tres valls equivalents. Amb aquesta finalitat farem una rotació d'angle θ al voltant de l'eix x. Rotem cadascuna les parts que composen aquest hamiltonià. Comencem per rotar $h_{cv} = P_l k_z \sigma_z + P_t k_x \sigma_x + P_t k_y \sigma_y$, eq. (1),

$$\begin{aligned} R_x(\theta) h_{cv} R_x(\theta)^{-1} &= P_l(k_y \sin\theta + k_z \cos\theta)(\sigma_z \cos\theta + \sigma_y \sin\theta) + P_t k_x \sigma_x \\ &\quad + P_t(k_y \cos\theta - k_z \sin\theta)(\sigma_y \cos\theta - \sigma_z \sin\theta) \\ &= \sigma_z \left[P_l(k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \cos^2\theta) + P_t(-k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \sin^2\theta) \right] + \sigma_x P_t k_x \\ &\quad + \sigma_y \left[P_l(k_y \sin^2\theta + k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta) + P_t(k_y \cos^2\theta - k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta) \right] \end{aligned} \tag{15}$$

Com estem interessats en saber com queden les masses i ja sabem que la inclusió de $(E - h_v)^{-1}$ com una funció $F(z)$ multiplicada per la matriu identitat $\mathbb{I}$, únicament fa que el terme cinètic siga $-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\frac{1}{m_z}\frac{d}{dz}$ en lloc de $-\frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{d^2}{dz^2}$, farem que el terme siga constant, de manera que fixem la nostra atenció en el producte $(R_x(\theta) h_{cv} R_x(\theta)^{-1})(R_x(\theta) h_{cv} R_x(\theta)^{-1})$. A partir de l'eq. anterior (15), calculem el quadrat de cadascun dels tres termes, que anomenem T_z, T_x i T_y,

$$\begin{aligned} T_z &= \mathbb{I} \left[P_l^2(k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \cos^2\theta)^2 + P_t^2(-k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \sin^2\theta)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2P_l P_t(k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \cos^2\theta)(-k_y \tfrac{1}{2} \sin 2\theta + k_z \sin^2\theta) \right] \\ T_x &= \mathbb{I} P_t^2 k_x^2 \\ T_y &= \mathbb{I} \left[P_l^2(k_y \sin^2\theta + k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta)^2 + P_t^2(k_y \cos^2\theta - k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta)^2 \right. \\ &\quad \left. + 2P_l P_t(k_y \sin^2\theta + k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta)(k_y \cos^2\theta - k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta) \right] \end{aligned} \tag{16}$$

La suma $T_z + T_y$ resulta

$$\begin{aligned} T_z + T_y &= P_l^2 \left[k_y^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + k_z^2 \cos^4\theta + k_y k_z \sin 2\theta \cos^2\theta + k_y^2 \sin^4\theta + k_z^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + k_y k_z \sin 2\theta \sin^2\theta \right] \\ &\quad + P_t^2 \left[k_y^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + k_z^2 \cos^4\theta - k_z k_y \sin 2\theta \sin^2\theta + k_y^2 \cos^4\theta + k_z^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta - k_y k_z \sin 2\theta \cos^2\theta \right] \\ &\quad + 2P_l P_t \left[-k_y^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + k_z^2 \sin^2\theta \cos^2\theta + k_y k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta(\sin^2\theta - \cos^2\theta) \right. \\ &\quad \left. + k_y^2 \sin^2\theta \cos^2\theta - k_z^2 \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + k_y k_z \tfrac{1}{2} \sin 2\theta(\cos^2\theta - \sin^2\theta) \right] \\ &= k_z^2 \left[P_z^2(\cos^4\theta + \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta) + P_t^2(\sin^4\theta + \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta) + 2P_l P_t(\sin^2\theta \cos^2\theta - \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta) \right] \\ &\quad + k_y^2 \left[P_z^2(\tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + \sin^4\theta) + P_t^2(\tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta + \cos^4\theta) + 2P_l P_t(\sin^2\theta \cos^2\theta - \tfrac{1}{4} \sin^2 2\theta) \right] \\ &\quad + k_y k_z \left[P_z^2 \sin 2\theta(\sin^2\theta + \cos^2\theta) - P_t^2 \sin 2\theta(\sin^2\theta + \cos^2\theta) \right] \\ &= k_z^2(P_l^2 \cos^2\theta + P_t^2 \sin^2\theta) + k_y^2(P_l^2 \sin^2\theta + P_t^2 \cos^2\theta) + k_y k_z(P_l^2 - P_t^2) \sin 2\theta \end{aligned}$$

a aquest resultat cal sumar $T_x = P_t^2 k_x^2$ que no canvia amb la rotació.

Ara precedim a la rotació del terme h_c:

$$\begin{aligned} R_x(\theta) h_c R_x(\theta)^{-1} &= \tfrac{E_g}{2} + \tfrac{\hbar^2}{2m_t} k_x^2 + \tfrac{\hbar^2}{2} (\tfrac{1}{m_t} \cos^2\theta + \tfrac{1}{m_l} \sin^2\theta) k_y^2 \\ &\quad + \tfrac{\hbar^2}{2} (\tfrac{1}{m_t} \sin^2\theta + \tfrac{1}{m_l} \cos^2\theta) k_z^2 + k_y k_z \tfrac{\hbar^2}{4} \sin 2\theta (\tfrac{1}{m_l} - \tfrac{1}{m_t}) \end{aligned} \tag{17}$$

Finalment calculem l'hamiltonià efectiu rotat com la suma dels dos termes rotats calculats.

Si rebutgem els termes creuats que són estrictament zero per a masses isotòpiques, veiem que l'hamiltonià efectiu rotat té la mateixa forma que el que no ha estat sotmès a rotació,[4]

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{d}{dx} \frac{1}{m_\perp} \frac{d}{dx} + \frac{d}{dy} \frac{1}{m_\perp} \frac{d}{dy} + \frac{d}{dz} \frac{1}{m_z} \frac{d}{dz} \right) + V(x, y, z) \tag{18}$$

si canviem les masses que acompanyen les segones derivades des de $(m_\perp, m_\perp, m_z)$ a unes noves masses (m_x, m_y, m_z) on:

$$\begin{aligned} \tfrac{1}{m_x} &= \tfrac{1}{m_t} \\ \tfrac{1}{m_y} &= \tfrac{1}{m_l} \sin^2\theta + \tfrac{1}{m_t} \cos^2\theta \\ \tfrac{1}{m_z} &= \tfrac{1}{m_l} \cos^2\theta + \tfrac{1}{m_t} \sin^2\theta \end{aligned} \tag{19}$$

Per rematar direm que el valor de l'angle θ corresponent als tres valls no equivalents amb l'eix z apuntant la direcció [111] és tal que $\cos\theta = \frac{1}{3}$. En el cas que l'eix z apunte en la direcció [100] tenim quatre valls equivalents i l'angle a considerar és tal que $\cos^2\theta = \frac{1}{3}$.

Referències

[1] Erasmo A. de Andrada e Silva, Optical transition energies for lead-salt semiconductor quantum wells, Phys Rev. B, 60 (1999) 8859. (warning, hi ha un desafortunat mistake en l'expressió de la massa rotada m_y que ve recollida en la Taula II del paper).

[4] Farem ací un aclariment del tot innecessari, excepte pot ser per estudiants que comencen –o fins i tot siga totalment superflu per tothom– És fàcil de comprovar que si un hamiltonià té una equació d'autovalors $H\Psi = E\Psi$, l'hamiltonià rotat, RHR^{-1} té els mateixos autovalors. En efecte, $H\Psi = HR^{-1}R\Psi = E\Psi$, Si multipliquem per R a esquerres i anomenen $\Phi = R\Psi$ trobem $RHR^{-1}R\Psi = RE\Psi = ER\Psi$, és a dir, $RHR^{-1}\Phi = E\Phi$. Aleshores, perquè tots aquests apunts tractant de trobar l'hamiltonià rotat? Doncs perquè cal precisar que volem dir: volem rotat l'hamiltonià però *deixar fixes* les condicions de contorn. Fiquem un exemple. Tenim una caixa 2D i un hamiltonià $H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m_x} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \frac{1}{m_y} \frac{d}{dy}$. Si la caixa és rectangular de longitud L_x, L_y, l'energia és $\frac{\hbar^2\pi^2}{2}(\frac{n_x^2}{m_x L_x^2}) + \frac{n_y^2}{m_y L_y^2})$. Si rotem $\pi/2$ l'estructura cristal·lina però mantenim el potencial confinant –és a dir la caixa no es mou– que podríem interpretar com dues caixes del mateix material però crescut en dues direccions diferents, aleshores canvia l'energia cinètica però no el potencial confinant ... que no apareix en l'equació diferencial perquè és zero dins de la caixa (o infinit fora de la caixa on no calculem perquè la funció és zero, atès que la probabilitat de trobar la partícula allí és zero per ser les parets de la caixa impenetrables). En altres paraules H canvia des de: $H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m_x} \frac{d}{dx} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \frac{1}{m_y} \frac{d}{dy}$ a $H = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \frac{1}{m_y} \frac{d}{dy} - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \frac{1}{m_x} \frac{d}{dx}$ (és a dir, no canvia)) però atenció, les condicions frontera són ara: longitud L_x en la direcció y i longitud L_y en la direcció x, de manera que l'energia passa a ser $\frac{\hbar^2\pi^2}{2}(\frac{n_x^2}{m_x L_y^2}) + \frac{n_y^2}{m_y L_x^2})$, que és diferent de la que hem calculat abans de rotar.

[2] M. de Dios Leyva and J. López-Gondar, Electronic structure of PbTe-$Pb_{1-x}Sn_xTe$ Superlattices, Phys. Stat. Sol. (b) 138 (1986) 253.

[3] A. C. Bartnik, Al. L. Efros, W.-K. Koh, C. B. Murray, and F. W. Wise, Electronic states and optical properties of PbSe nanorods and nanowires, Phys Rev. B, 82 (2010) 195313